Grado en Físicas

Métodos Numéricos

Tema 3. Derivación e integración

Alejandro Medina

Curso 2016/17, Octubre 2016

Esquema

Esquema

1. Derivación
   - Datos discretos
   - Datos continuos
2. Integración
3. Ejercicios

Derivación numérica

Cabe distinguir dos casos genéricos de derivación numérica:

I) Datos discretos: se conoce el valor de la función a derivar únicamente en un conjunto discreto de puntos. Este planteamiento es interesante cuando:

- la evaluación de la función es muy costosa por lo que es aconsejable aproximarla a partir de su valor en un cierto conjunto discreto de puntos.
- los valores conocidos de la función tienen mucho *ruido* por lo que es conveniente derivar un polinomio de mínimos cuadrados que reproduzca su comportamiento.

II) Datos continuos: la evaluación de la función se puede realizar en cualquier punto.

Derivación: Datos discretos

El procedimiento habitual en este caso consiste en calcular una interpolación y posteriormente diferenciar analíticamente el polinomio interpolador.

Derivación de una interpolación de Lagrange

Dados los puntos, $\{x_0, x_1 \dots x_n\}$, y los valores de la función en dichos puntos, $\{f_0, f_1 \dots f_n\}$, se puede realizar una interpolación de Lagrange de modo que:

$$f(x) \simeq P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \ell_i(x) \quad \text{con} \quad \ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

$$\Longrightarrow \quad f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \ell_i'(x)$$

Derivación: Datos discretos

Derivación de una interpolación por *splines*

En cada segmento $[x_i, x_{i+1}]$ $(i = 0, \ldots n-1)$ se tiene,

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i,$$

de donde derivando se tiene que para $x \in [x_i, x_{i+1}]$ $(i = 0, 1 \ldots n-1)$:

$$f(x) \simeq S_i'(x) = 3a_i(x - x_i)^2 + 2b_i(x - x_i) + c_i$$

Derivación: Datos continuos

En este caso podemos elegir con libertad el número y las posiciones de los puntos donde se va a evaluar la función. Podría entonces esperarse que la derivada se obtenga de una manera más precisa. Veremos, sin embargo, que en este caso existen también ciertas restricciones.

Método de los decrementos de h

Supongamos que podemos evaluar una función, $f(x)$, en todos los puntos de un intervalo $[a, b]$ y que los puntos $\bar{x}$, $\bar{x}+h$ y $\bar{x}-h$ pertenecen a dicho intervalo. A partir del desarrollo en serie de Taylor de la función $f(x)$, podemos escribir:

$$f(\bar{x}+h) = f(\bar{x}) + hf'(\bar{x}) + \frac{h^2}{2!}f''(\bar{x}) + \ldots$$
$$f(\bar{x}-h) = f(\bar{x}) - hf'(\bar{x}) + \frac{h^2}{2!}f''(\bar{x}) - \ldots$$

Derivación: Datos continuos

Sumando y restando los 2 desarrollos, se pueden despejar la primera y segunda derivada de $f(x)$ así:

$$f'(\bar{x}) \simeq \frac{f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}-h)}{2h} \quad \text{(fórmula simétrica)}$$

$$f''(\bar{x}) \simeq \frac{f(\bar{x}-h) + f(\bar{x}+h) - 2f(\bar{x})}{h^2}$$

El error en estas aproximaciones es del orden $O(h^2)$

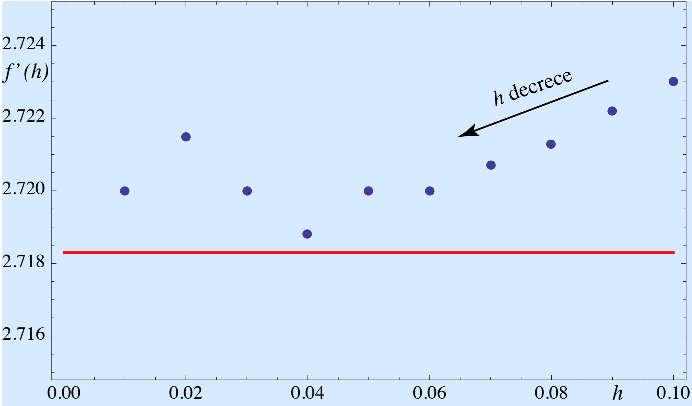
Derivación: Datos continuos

Ejemplo:

Dada la función $f(x) = e^x$, calcularemos su derivada en $x = 1$.
Como referencia sabemos que el valor exacto de la derivada es 2,7183.
Comenzaremos con un h inicial de 0,10 y lo disminuimos hasta 0,01.

h	0,10	0,09	0,08	0,07	0,06
$f'(1,0)$	2,7230	2,7222	2,7213	2,7207	2,7200
h	0,05	0,04	0,03	0,02	0,01
$f'(1,0)$	2,7200	2,7188	2,7200	2,72175	2,7200

Derivación: Datos continuos



Al disminuir h por debajo de $0,04$ el resultado empeora.

Extrapolación de Richardson

$$f'(\bar{x}) = -\frac{1}{6h}\left[f(\bar{x}+h) - 8f\left(\bar{x}+\frac{h}{2}\right) - f(\bar{x}-h) + 8f\left(\bar{x}-\frac{h}{2}\right)\right] + \frac{h^4}{480} f^{(V)}(\bar{x})$$

Ejemplo:

Resultados obtenidos con 3 fórmulas de derivación diferentes: ecuación no simétrica, ecuación simétrica y fórmula de Richardson. También se representan los errores relativos correspondientes (E).
Se ha elegido como función $f(x) = e^x$ y la derivada se calcula en $x = 1$.
Se presentan también los errores relativos de los 3 procedimientos comparando con el valor analítico de la derivada.

h	$f_{\text{no sim.}}$	$f_{\text{sim.}}$	$f_{\text{Richard.}}$	$E_{\text{no sim.}}$	$E_{\text{sim.}}$	$E_{\text{Richard.}}$
0.10	0.285884E+01	0.272281E+01	0.271828E+01	.517E+01	.167E+00	.208E-04
0.09	0.284436E+01	0.272195E+01	0.271828E+01	.464E+01	.135E+00	.137E-04
0.08	0.282997E+01	0.272118E+01	0.271828E+01	.411E+01	.107E+00	.853E-05
0.07	0.281568E+01	0.272050E+01	0.271828E+01	.358E+01	.817E-01	.500E-05
0.06	0.280149E+01	0.271991E+01	0.271828E+01	.306E+01	.600E-01	.270E-05
0.05	0.278739E+01	0.271941E+01	0.271828E+01	.254E+01	.417E-01	.130E-05
0.04	0.277338E+01	0.271901E+01	0.271828E+01	.203E+01	.267E-01	.533E-06
0.03	0.275947E+01	0.271869E+01	0.271828E+01	.152E+01	.150E-01	.169E-06
0.02	0.274565E+01	0.271846E+01	0.271828E+01	.101E+01	.667E-02	.333E-07

La mejora de la fórmula de Richardson respecto a las otras es muy considerable.

Esquema

Integración

Sea una función $f(x)$ definida en un intervalo $[a, b]$. Pretendemos calcular $\int_a^b f(x)\, dx$.

Así pues, dados $\{x_0, x_1 \ldots x_n\}$ y $\{f_0, f_1 \ldots f_n\}$,

$$f(x) \simeq P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \ell_i(x) \quad \text{donde} \quad \ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

De esta forma la integral quedaría:

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \int_a^b P_n(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} f_i \int_a^b \ell_i(x)\, dx \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i f_i,$$

donde $A_i = \int_a^b \ell_i(x)\, dx$

Integración

Fórmulas de Newton-Cotes

En el caso en que los nodos $\{x_i\}$ estén equiespaciados las expresiones que se obtienen a partir de la ecuación anterior se denominan *fórmulas de Newton-Cotes*

En este caso:

$$x_0 = a\,, \quad x_n = b \quad \text{y} \quad x_k = a + kh,$$

siendo $k = 1, 2 \ldots n-1$ y $h = (b-a)/n$.

Error en las fórmulas de Newton-Cotes

Teorema:
Sea $f(x)$ una función $n+2$ veces diferenciable y con continuidad en el intervalo $[a,b]$. El error de una fórmula de Newton-Cotes *cerrada* que usa un polinomio interpolador de grado n, $P_n(x)$, viene dado por:

I) Para n par:

$$E_{\mathrm{integ},n} = c_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta) \quad \longrightarrow \quad O\left[h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)\right],$$

donde $\eta \in [a,b]$ y c_n es un coeficiente calculable.

$$c_n = \frac{1}{(n+2)!}\int_0^n \mu^2(\mu-1)(\mu-2)\ldots(\mu-n)\,d\mu.$$

II) Para n impar:

$$E_{\mathrm{integ},n} = c_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta) \quad \longrightarrow \quad O\left[h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)\right],$$

con $\eta \in [a,b]$.

$$c_n = \frac{1}{(n+1)!}\int_0^n \mu(\mu-1)(\mu-2)\ldots(\mu-n)\,d\mu.$$

Error en las fórmulas de Newton-Cotes

Teorema: Sea $f(x)$ una función $n+2$ veces diferenciable y con continuidad en el intervalo $[a, b]$. El error de una fórmula de Newton-Cotes *abierta* que utiliza un polinomio interpolador de grado n, $P_n(x)$, viene dado por:

I) Para n par:

$$E_{\text{integ},n} = c_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta) \quad \longrightarrow \quad O\left[h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)\right],$$

donde $\eta \in [a, b]$ y

$$c_n = \frac{1}{(n+2)!} \int_{-1}^{n+1} \mu^2(\mu-1)(\mu-2)\ldots(\mu-n)\, d\mu.$$

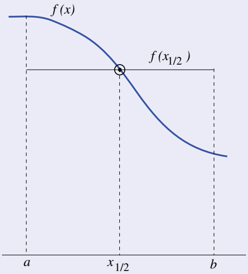
II) Para n impar:

$$E_{\text{integ},n} = c_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta) \quad \longrightarrow \quad O\left[h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)\right],$$

con $\eta \in [a, b]$ y

$$c_n = \frac{1}{(n+1)!} \int_{-1}^{n+1} \mu(\mu-1)(\mu-2)\ldots(\mu-n)\, d\mu.$$

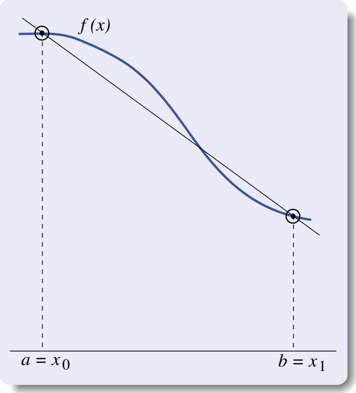
Regla del punto medio o del rectángulo (*abierta*, $n = 0$)



$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right)\,dx + \frac{1}{3}h^3 f''(\eta) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{3}h^3 f''(\eta)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq hf_{1/2} + O(h^3 f'') \qquad \text{donde} \quad h \equiv b - a.$$

Regla del trapecio (*cerrada*, $n = 1$)



$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_{x_0}^{x_1} \left[f_0 \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right) + f_1 \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right) \right] dx + O(h^3 f'') =$$

$$= \frac{f_0}{x_0 - x_1} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_1)\,dx + \frac{f_1}{x_1 - x_0} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,dx =$$

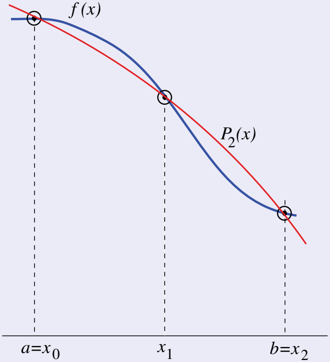
$$= \cdots = \frac{x_1 - x_0}{2}(f_0 + f_1) + O(h^3 f'') = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + O(h^3 f'')$$

$$c_1 = \frac{1}{2} \int_0^1 \mu(\mu - 1)\,d\mu = \frac{1}{2} \int_0^1 (\mu^2 - \mu)\,d\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \right) = -\frac{1}{12}$$

$$E_{\text{integ},1} = -\frac{1}{12} h^3 f''(\eta)$$

$$\Longrightarrow \quad \int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}(f_0 + f_1) - \frac{1}{12} h^3 f''(\eta)$$

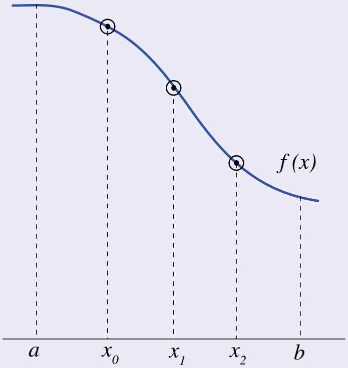
Regla de Simpson (*cerrada*, $n = 2$)



$$f(x) \simeq P_2(x) \quad \Longrightarrow \quad \int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{h^5}{90} f^{(IV)}(\eta)$$

donde $h = x_i - x_{i-1}$, $a = x_0$, $b = x_0 + 2h$.

Regla de Milne (*abierta*, $n = 2$)



$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{4h}{3}(2f_0 - f_1 + 2f_2) + \frac{14h^5}{45} f^{(IV)}(\eta)$$

Ejemplo:

$$I = \int_1^2 \frac{1}{x}\, dx \quad \longrightarrow \quad \text{Valor exacto:} \quad I = \log 2 = 0,693147$$

- Regla del punto medio:

$$I \simeq h f_{1/2} = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) = 0,666667 \qquad e_r = 4\,\%$$

- Regla del trapecio:

$$I \simeq \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] = 0{,}75 \qquad e_r = 8\,\%$$

- Regla de Simpson:

$$h = \frac{b-a}{2} \quad \longrightarrow \quad I \simeq \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] = 0,694444 \qquad e_r = 0,2\,\%$$

- Regla 3/8 de Simpson:

$$h = \frac{b-a}{3} \quad \longrightarrow \quad I \simeq \frac{b-a}{8}\left[f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b)\right] = 0,693750 \qquad e_r = 0,09\,\%$$

Método de los coeficientes indeterminados

A partir de la interpolación lagrangiana hemos obtenido que,

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i f_i \quad \text{donde} \quad A_i = \int_a^b \ell_i(x)\,dx. \tag{1}$$

Una vez fijados los nodos, los coeficientes A_i no dependen de la forma de $f(x)$ sino sólo de n.
Un método para calcularlos consiste en aplicar la fórmula (1) a un conjunto de *funciones de prueba*, por ejemplo, a los polinomios $\{1, x \ldots x^n\}$:

$$\int_a^b x^m\,dx = \left.\frac{x^{m+1}}{m+1}\right]_a^b = \frac{b^{m+1} - a^{m+1}}{m+1} = \sum_{i=0}^{n} x_i^m A_i \qquad (m = 0, 1 \ldots n)$$

La última igualdad es la base del *método de los coeficientes indeterminados*:
se consideran desconocidos los coeficientes A_i y esas ecuaciones se toman como un sistema de $n+1$ ecuaciones con $n+1$ incógnitas.

Método de los coeficientes indeterminados

EJEMPLO:

Supongamos que queremos calcular $\int_0^1 f(x)\,dx$ utilizando 3 puntos: $x_0 = 0$, $x_1 = 1/2$ y $x_2 = 1$.

$$\int_0^1 f(x)\,dx = A_0 f_0 + A_1 f_1 + A_2 f_2.$$

Si aplicamos esta ecuación a las funciones de prueba, $\{1, x, x^2\}$, se obtiene el siguiente sistema:

$$\int_0^1 dx = A_0 + A_1 + A_2 \quad \Longrightarrow \quad 1 = A_0 + A_1 + A_2$$

$$\int_0^1 x\,dx = \frac{1}{2}A_1 + A_2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{1}{2} = \frac{1}{2}A_1 + A_2$$

$$\int_0^1 x^2\,dx = \frac{1}{4}A_1 + A_2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{1}{3} = \frac{1}{4}A_1 + A_2$$

Resolviendo se obtiene: $A_0 = A_2 = 1/6$, $A_1 = 2/3$. Así pues,

$$\int_0^1 f(x)\,dx \simeq \frac{1}{6}f_0 + \frac{2}{3}f_1 + \frac{1}{6}f_2 = \frac{1}{6}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right) \quad \longrightarrow \quad \text{regla de Simpson}$$

Fórmulas de integración general

El procedimiento que condujo a las fórmulas de Newton-Cotes, puede extenderse para obtener fórmulas de integración más generales, del tipo:

$$\int_a^b f(x)\,\omega(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^{(n)} f(x_i) \tag{2}$$

con $\alpha_i^{(n)} = \int_a^b \ell_i(x)\omega(x)\,dx$ donde $\omega(x)$ puede ser cualquier *función peso*.

Definición de *función peso*: sea $\omega(x)$ una función definida en el intervalo $[a, b]$. Se dice que es una función peso si verifica:

A) $\omega(x) \geq 0 \quad \forall x \in [a, b]$.

B) Las integrales $\int_a^b \mid x \mid^m \omega(x)\,dx$ existen y están acotadas $\forall m \geq 0$.

C) Si $\int_a^b \omega(x)g(x)^2\,dx = 0$ con $g(x)$ continua, entonces $g(x) = 0$.

El interés de la ecuación (2) reside en que, $\omega(x)$, puede elegirse para que mediante un número mínimo de nodos, $\{x_i\}$, puedan calcularse las integrales con un grado de precisión máximo.

Cuadratura gaussiana

$n = 0$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \alpha_0^{(0)} f(x_0)$$

Las condiciones a imponer son dos ($k = 0, 1$):

$$\begin{cases} 0 = E_0(1) = \int_{-1}^{1} dx - \alpha_0^{(0)} \implies \alpha_0^{(0)} = 2 \\ 0 = E_1(x) = \int_{-1}^{1} x\,dx - \alpha_0^{(0)} x_0 \implies x_0 = 0 \end{cases}$$

Así pues,

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq 2f(0),$$

ecuación que corresponde a la regla del punto medio en el intervalo $[-1, 1]$. El grado de precisión de esta fórmula es 1.

Cuadratura gaussiana

$n = 1$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \alpha_0^{(1)} f(x_0) + \alpha_1^{(1)} f(x_1)$$

Necesitamos 4 condiciones, pues tenemos 4 incógnitas para determinar: $E_1(x^k) = 0$ con $(k = 0, 1, 2, 3)$.

$$0 = E_1(1) = \int_{-1}^{1} dx - \alpha_0^{(1)} - \alpha_1^{(1)} \implies 2 = \alpha_0^{(1)} + \alpha_1^{(1)}$$

$$0 = E_1(x) = \int_{-1}^{1} x\,dx - \alpha_0^{(1)} x_0 - \alpha_1^{(1)} x_1 \implies 0 = \alpha_0^{(1)} x_0 + \alpha_1^{(1)} x_1$$

$$0 = E_1(x^2) = \int_{-1}^{1} x^2\,dx - \alpha_0^{(1)} x_0^2 - \alpha_1^{(1)} x_1^2 \implies \frac{2}{3} = \alpha_0^{(1)} x_0^2 + \alpha_1^{(1)} x_1^2$$

$$0 = E_1(x^3) = \int_{-1}^{1} x^3\,dx - \alpha_0^{(1)} x_0^3 - \alpha_1^{(1)} x_1^3 \implies 0 = \alpha_0^{(1)} x_0^3 + \alpha_1^{(1)} x_1^3$$

Solución $\longrightarrow \alpha_0^{(1)} = \alpha_1^{(1)} = 1; \quad x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}; \quad x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3} \implies \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$

Cuadratura gaussiana

$n = 2$

En este caso se puede demostrar como ejercicio que,

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right).$$

Con 3 nodos se obtiene un grado de precisión 5. En cuanto a número de nodos esta fórmula es como la de Simpson, pero en aquella el grado de precisión es sólo 3.

Ejemplo:

$$I = \int_1^2 \frac{1}{z}\, dz = 0,693147$$

Cambio de variables ($z \in [a, b]$; $\quad x \in [-1, 1]$):

$$x = \frac{z - \frac{b+a}{2}}{\frac{b-a}{2}} \quad \longrightarrow \quad x = 2\left(z - \frac{3}{2}\right) \quad \longrightarrow \quad z = \frac{1}{2}(x+3); \quad dz = \frac{1}{2}dx$$

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{dx}{x+3} \quad \longrightarrow \quad f(x) = \frac{1}{x+3}$$

- $n = 0$

$$I \simeq 2f(0) = \tfrac{2}{3} = 0,666667 \qquad e_r = 4\,\%$$

- $n = 1$

$$I \simeq f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) = 0,6923076 \qquad e_r = 0{,}12\,\%$$

- $n = 2$

$$I \simeq \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = 0,693122 \qquad e_r = 0,004\,\%$$

Cuadratura gaussiana con polinomios ortogonales

Funciones peso y familias de polinomios ortogonales

Polinomios de Legendre

- Peso: $\omega(x) = 1$.
- Intervalo: $[a, b] = [-1, 1]$.
- Expresión del polinomio de grado j (*fórmula de Rodrigues*):

$$P_j(x) = \frac{1}{2^j j!} \frac{d^j}{dx^j} (x^2 - 1)^j$$

- Relación de recurrencia:

$$(j+1)P_{j+1}(x) = (2j+1)xP_j(x) - jP_{j-1}(x).$$

n	Ceros x_i $(i = 0, 1, \dots, n)$	Pesos α_i $(i = 0, 1, \dots, n)$
1	±0,57735 02691 89626	1,00000 00000 00000
2	0,00000 00000 00000	0,88888 88888 88889
	±0,77459 66692 41483	0,55555 55555 55556
3	±0,33998 10435 84856	0,65214 51548 62546
	±0,86113 63115 94053	0,34785 48451 37454
.	. . .	. . .
9	±0,14887 43389 81631	0,29552 42247 14753
	±0,43339 53941 29247	0,26926 67193 09996
	±0,67940 95682 99024	0,21908 63625 15982
	±0,86506 33666 88985	0,14945 13491 50581
	±0,97390 65285 17172	0,06667 13443 08688
.	. . .	. . .
19	±0,07652 65211 334973383	0,15275 33871 30725865
	±0,22778 58511 41645068	0,14917 29864 72603769
	±0,37370 60887 15419549	0,14209 61093 18382152
	±0,51086 70019 50827126	0,13168 86384 49176554
	±0,63605 36807 26515025	0,11819 45319 61517649
	±0,74633 19064 60150796	0,10193 01198 17233281
	±0,83911 69718 22218782	0,083276 74157 67046854
	±0,91223 44282 51325946	0,062672 04833 41089707
	±0,96397 19272 77913809	0,0406014 29800 3869248
	±0,99312 85991 85094885	0,017614 00713 91504699

Cuadratura gaussiana con Polinomios de Legendre: implementación

Dado un intervalo cualquiera, $[a, b]$, y una función $F(z)$ definida en él, se pretende calcular:

$$I = \int_a^b F(z)\, dz$$

i) Cambio de variables:

$$x = \frac{z - \frac{1}{2}(b+a)}{\frac{1}{2}(b-a)} \quad \Longrightarrow \quad dx = \frac{dz}{\frac{1}{2}(b-a)}; \qquad dz = \frac{1}{2}(b-a)\, dx$$

$$z = b \longrightarrow \quad x = 1; \qquad z = a \longrightarrow \quad x = -1 \qquad \Longrightarrow \qquad z = \frac{1}{2}(b+a) + \frac{1}{2}(b-a)x$$

ii) Cálculo de la integral:

$$I = \frac{1}{2}(b-a) \int_{-1}^{1} F\left(\frac{b+a+(b-a)x}{2}\right) dx \quad \Longrightarrow \int_a^b F(z)\, dz \simeq \frac{1}{2}(b-a) \sum_{i=0}^{n} \alpha_i F\left(\frac{b+a+(b-a)x_i}{2}\right)$$

con los $\{\alpha_i, x_i\}$ tabulados anteriormente.

Ejemplo:

$$I = \int_1^2 \frac{1}{z}\, dz = 0,693147$$

Cambio de variables:

$$x = 2\left(z - \frac{3}{2}\right) \longrightarrow z = \frac{1}{2}(x+3); \quad dz = \frac{1}{2}dx$$

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{dx}{x+3} \longrightarrow f(x) = \frac{1}{x+3}$$

- $n = 1$

$$I = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1) = f(0,577350) + f(-0,577350) = 0,692308 \qquad e_r = 0,12\,\%$$

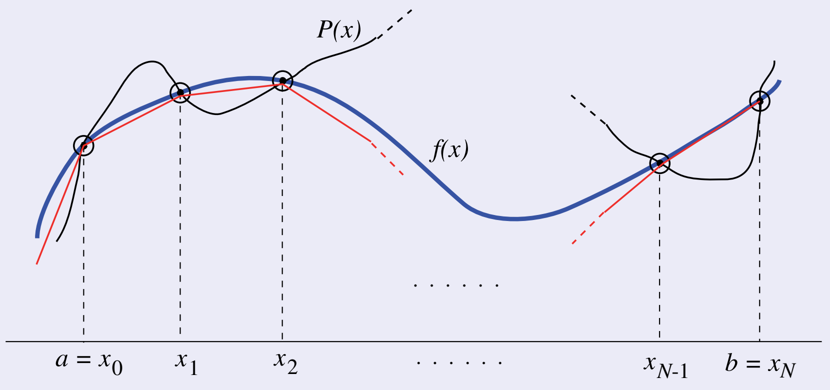
- $n = 2$

$$I = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1) + \alpha_2 f(x_2) =$$
$$= 0,888889 f(0) + 0,555556\,[f(0,774597) + f(-0,774597)] =$$
$$= 0{,}693122 \qquad e_r = 0{,}004\,\%$$

- $n = 3$ $I = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1) + \alpha_2 f(x_2) + \alpha_3 f(x_3) =$

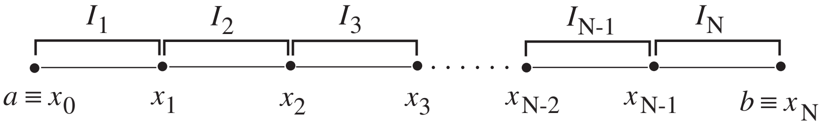
$$= 0,652145\,[f(0,339981) + f(-0,339981)] + 0,347855\,[f(0,861136) + f(-0,861136)] =$$
$$= 0,693146 \qquad e_r = 1,4 \times 10^{-4}\,\%$$

Fórmulas de cuadratura compuestas



Reglas compuestas no adaptativas

Regla trapezoidal compuesta



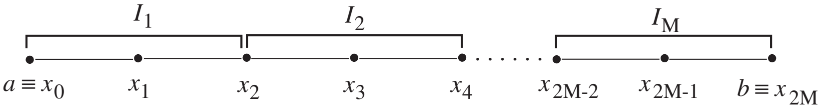
$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{b-a}{N}\left(\frac{f_0+f_N}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} f_i\right) + O\left[\frac{(b-a)^3}{N^2} f''(\eta)\right].$$

Llamando, $I_N(f)$, al primer sumando de esta ecuación, el error, $E_h\left[I_N(f)\right]$, con $h = (b-a)/N$ viene dado por:

$$E_h\left[I_N(f)\right] = \left|\int_a^b f(x)\,dx - I_N(f)\right| = \frac{h^2(b-a)}{12} f''(\eta).$$

Reglas compuestas no adaptativas

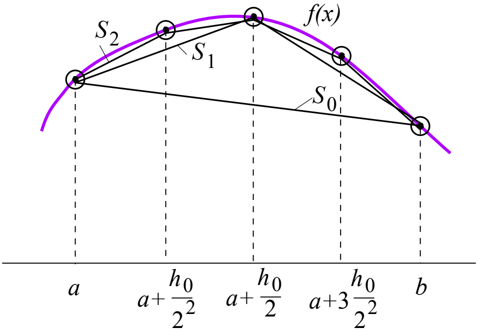
Regla de Simpson compuesta



$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{3N}\left(f_0 + f_N + 4\sum_{j=1}^{M} f_{2j-1} + 2\sum_{j=1}^{M-1} f_{2j}\right) + O\left[\frac{(b-a)^5}{N^4} f^{(IV)}(\eta)\right].$$

Reglas compuestas adaptativas

Regla del trapecio adaptativa



$$S_k = \frac{1}{2} S_{k-1} + h_k \sum_{i=1}^{2^{k-1}} f\left[a + (2i-1)h_k\right] \quad \text{con} \quad h_k = \frac{b-a}{2^k}; \quad k = 1, 2 \ldots$$

EJEMPLO:

Utilizaremos la cuadratura adaptativa para calcular la integral:

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \log 2 = 0{,}6931471$$

$$*S_0 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{4} = 0,75 \qquad e_r = 8\,\%$$

$$*S_1 = \frac{S_0}{2} + h_1 f(a+h_1) = \frac{0{,}75}{2} + 0{,}5\frac{1}{1+0{,}5} = 0{,}708333 \qquad [h_1 = (b-a)/2 = 0{,}5)] \quad e_r = 2\,\%$$

$$*S_2 = \frac{S_1}{2} + h_2\left[f(a+h_2) + f(a+3h_2)\right] =$$

$$= \frac{0{,}708333}{2} + 0,25[f(0,25) + f(0,75)] = 0{,}697024$$

$$[h_2 = (b-a)/4 = 0{,}25)] \qquad e_r = 0,6\,\%$$

$$*S_3 = \frac{1}{2}S_2^2 + h_3\left[f(a+h_3) + f(a+3h_3) + f(a+5h_3) + f(a+7h_3)\right] =$$

$$= \frac{0,697024}{2} + \frac{1}{8}\left[f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right)\right] = 0,694122$$

$$[h_3 = (b-a)/8 = 0{,}125)] \qquad e_r = 0,1\,\%$$

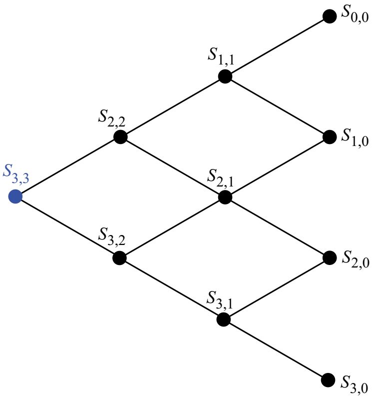
Fórmula de Euler-MacLaurin y números de Bernoulli

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = S_k - \frac{B_2 h_k^2}{2!}\left[f'(b) - f'(a)\right] - \cdots - \frac{B_{2j} h_k^{2j}}{2!}\left[f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)\right],$$

donde, B_i, son los *números de Bernoulli*. Todos los impares son nulos salvo el B_1.

i	0	1	2	4	6	8	10	12
B_i	1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{30}$	$\frac{1}{42}$	$-\frac{1}{30}$	$\frac{5}{66}$	$-\frac{691}{2730}$

Método de Romberg



$$S_{k,j} = \frac{4^j S_{k,j-1} - S_{k-1,j-1}}{4^j - 1} \qquad \text{Error:} \quad O\left[\left(\frac{b-a}{2^k}\right)^{2(j+1)}\right]$$

Método de Romberg

Ejemplo:

Calcularemos mediante el método de Romberg la integral que ya hemos estimado anteriormente por otros procedimientos:

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \log(1+x)\Big]_0^1 = 0{,}6931471$$

Para esta integral habíamos calculado:

$$S_{0,0} = 0{,}75; \quad S_{1,0} = 0{,}70833; \quad S_{2,0} = 0{,}697024 \quad \longrightarrow \quad e_r = 0,1\,\%$$

A partir de ellos podemos construir:

$$S_{1,1} = \frac{4S_{1,0} - S_{0,0}}{3} = 0{,}694444$$

$$S_{2,1} = \frac{4S_{2,0} - S_{1,0}}{3} = 0{,}693254$$

$$S_{2,2} = \frac{4^2 S_{2,1} - S_{1,1}}{15} = 0{,}693175 \quad \longrightarrow \quad e_r = 4,0 \times 10^{-3}\,\%$$

Vemos que, $S_{2,2}$, coincide en las 4 primeras cifras decimales con el valor exacto de la integral y mejora claramente, $S_{2,0}$, que sólo coincidía en 2 decimales.

Integrales múltiples

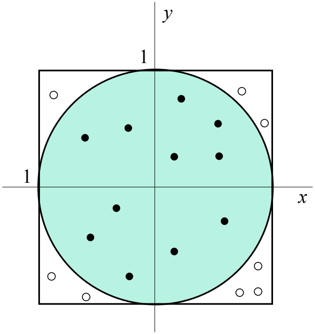
Planteamiento en 2D:

$$\int\int_S f(x,y)\,dxdy = \int_{x_1}^{x_2}\int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x,y)\,dy\,dx = \int_{x_1}^{x_2} G(x)\,dx$$

con $G(x) = \displaystyle\int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x,y)\,dy$.

Técnicas Montecarlo

Ejemplo:
Objetivo: determinar el área de un círculo de radio 1.



$$\frac{\text{área bajo el arco de circunferencia}}{\text{área bajo el cuadrado}} = \frac{N_{\text{in}}}{N} \quad \Longrightarrow \quad I \simeq \frac{N_{\text{in}}}{N}$$

Porque en este caso sencillo el área del cuadrado es 1.

Esquema

Ejercicios

1.- Un circuito eléctrico está formado por una bobina de inductancia L, una resistencia R y un generador que produce una fuerza electromotriz $\varepsilon(t)$. Según la segunda ley de Kirchoff,

$$\varepsilon = L\frac{dI}{dt} + RI$$

donde $I = I(t)$ es la intensidad de corriente.
Se realiza en el laboratorio una tabla de intensidades en distintos instantes de tiempo para un circuito con $L = 0{,}98$ H y $R = 0{,}142\,\Omega$:

t (s)	1,0	1,01	1,02	1,03	1,04
I (A)	3,10	3,12	3,14	3,18	3,24

Calcula el voltaje en todos esos instantes de tiempo.

Ejercicios

2.- Se considera la siguiente fórmula de Newton-Cotes para el cálculo numérico de integrales definidas:

$$\int_0^1 f(x)\,dx \simeq \alpha\, f(1/4) + \beta\, f(1/2) + \gamma\, f(3/4)$$

Determínense los valores de α, β, γ para que dicha fórmula sea exacta para polinomios de grado lo más alto posible. ¿ Cuál es el grado de precisión de la fórmula obtenida? Utilícese la misma para calcular el valor de la función *dilogaritmo*:

$$f(x) = -\int_0^x \frac{\log(1-t)}{t}\,dt,$$

en el punto $x = 1/2$.

Ejercicios

3.- Se considera la siguiente fórmula de Newton-Cotes para el cálculo numérico de integrales definidas:

$$\int_0^1 f(x)\,dx \simeq \frac{2}{3}\,f(1/4) - \frac{1}{3}\,f(1/2) + \frac{2}{3}\,f(3/4)$$

Utilícese esta fórmula para el cálculo de la siguiente integral doble:

$$\int_0^1 dx \int_0^x \frac{\operatorname{sen}(xy)}{xy}\,dy.$$

EJERCICIOS

4.- Se considera la siguiente fórmula de cuadratura:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \simeq A\,f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + B\,f(0) + C\,f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right). \qquad (3)$$

Encuéntrense los valores de los coeficientes A, B y C para los cuales la Ec. (3) es una fórmula de cuadratura Gaussiana de tres puntos. Utilícese la Ec. (3) con los valores de A, B y C calculados anteriormente para calcular un valor aproximado de la integral:

$$\int_{0}^{4} \frac{\operatorname{sen} x}{x}\, dx$$

Ejercicios

5.- Considérese la siguiente fórmula de integración numérica:

$$\int_0^1 f(x)dx \simeq \frac{1}{90}\left[7f(0) + 32f(1/4) + 12f(1/2) + 32f(3/4) + 7f(1)\right] \tag{4}$$

A) Determínese el grado máximo, $n_{\max}$, de los polinomios $\{P_n(x)\}$ para los cuales la Ec. (4) es una fórmula de integración exacta.

B) ¿ Es una fórmula de cuadratura Gaussiana? Razónese la respuesta.

C) Sabiendo que,

$$\frac{d(\arctan x)}{dx} = \frac{1}{1+x^2},$$

y haciendo uso de la fórmula de cuadratura (4), calcúlese un valor aproximado para el número π. Compárese dicho valor con el valor de π obtenido directamente en la calculadora.

Ejercicios

6.- Utilizando la regla de Simpson compuesta, calcula:

$$I = \int_0^2 e^x \, dx,$$

de modo que la diferencia entre el valor exacto y el aproximado coincidan en las tres primeras cifras decimales.

7.- Utilizando el método de integración de Romberg, calcula $S_{3,3}$ para la integral:

$$I = \int_0^1 x^2 e^{-x} \, dx.$$

EJERCICIOS

8.- a) Determínese un valor aproximado de log 2, planteando una integral y resolviéndola numéricamente con la *regla del trapecio compuesta* para obtener las aproximaciones, S_k.

$$\log 2 \simeq I = S_k \qquad \text{con} \quad k = 0, 1, 2, 3, 4$$

b) Desarrolla esquemáticamente el *método de Romberg* para llegar a una aproximación, $\log 2 \simeq I = S_{4,4}$.
c) Calcula numéricamente dicha aproximación, $S_{4,4}$. ¿Qué error relativo se comete al aproximar el valor de log 2 dado por la calculadora y $S_{4,4}$? (Utilícense 7 cifras significativas en todos los cálculos.)